УДК 519.6
DOI: 10.46548/21vek-2021-1056-0007

ПРОБЛЕМЫ УСТОЙЧИВОСТИ И РАЗРЕШИМОСТИ ПРИ МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА В ПРОТОЧНОМ ТРЕХМЕРНОМ ЭЛЕКТРОДЕ

Гвоздева Ирина Геннадьевна, старший преподаватель
кафедры «Информационно-вычислительные системы»
Кошев Александр Николаевич, доктор химических наук,
профессор кафедры «Информационно-вычислительные системы»
Пензенский государственный университет архитектуры и строительства
(440028, Россия, г. Пенза, ул. Германа Титова, 28, e-mails: gvozd_69@mail.ru, koshev@pguas.ru)
Варенцов Валерий Константинович, доктор технических наук, профессор,
ведущий научный сотрудник лаборатории гетерогенных систем
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН
(630128, Россия, г. Новосибирск, ул. Кутателадзе, 18, e-mail: vvk@ngs.ru)
Кузина Валентина Владимировна, кандидат технических наук,
доцент кафедры «Информационно-вычислительные системы»
Пензенский государственный университет архитектуры и строительства
(440028, г. Пенза, ул. Германа Титова, 28, e-mail: kuzina@pguas.ru)

Аннотация. Математическое моделирование позволяет изучать работу проточных трехмерных электродов в динамике, исследовать закономерности их работы в зависимости от кинетики электродных процессов, свойств системы электрод – раствор, условий электролиза, конструкции электродной системы и др. Однако для корректного проведения расчетов и правильной интерпретации результатов требуют освещения вопросы математической устойчивости и разрешимости моделирующих уравнений, поскольку исследуемая система дифференциальных уравнений не является классически устойчивой как к изменению начальных данных, так и к ошибкам правой части системы. Этот факт позволяет классифицировать такую систему как жесткую, для решения которой используется «метод стрельбы». Цель исследования – решение вопросов математической устойчивости и разрешимости дифференциальных уравнений, моделирующих распределение электрохимического процесса в проточном трехмерном электроде, используемом для очистки промышленных сточных вод от ионов тяжелых и цветных металлов. В силу сложности и многомерности математических уравнений проблемы устойчивости и разрешимости рассмотрены при естественных упрощениях и допущениях, однако не снижающих общности их применимости для сложных многомерных математических моделей, описывающих окислительно-восстановительные процессы в проточных трехмерных электродах в полной постановке. В результате исследований выявлено, что моделирующая система дифференциальных уравнений не является классически устойчивой как к изменению начальных данных, так и к ошибкам правой части системы. Используемый для ее решения метод «стрельбы» необходимо постоянно контролировать, что и выполняется нами с помощью выведенной асимптотической оценки.

Ключевые слова: математическое моделирование электрохимических процессов, проточные трехмерные электроды, углеграфитовые волокнистые материалы, очистка сточных вод от ионов металлов, устойчивость и разрешимость моделирующих уравнений.

PROBLEMS OF STABILITY AND SOLVABILITY IN MATHEMATICAL MODELING OF THE DISTRIBUTION OF AN ELECTROCHEMICAL PROCESS IN A FLOWING THREE-DIMENSIONAL ELECTRODE

Gvozdeva Irina Gennadievna, senior lecturer of the department «Information and computing systems»
Koshev Alexander Nikolaevich, doctor of chemistry science,
professor of the department «Information and computing systems»
Penza State University of Architecture and Construction
(440028, Russia, Penza, German Titov St., 28, e-mails: gvozd_69@mail.ru, koshev@pguas.ru)
Varentsov Valery Konstantinovich, doctor of technical sciences, professor
Solid Stete Chemistry and Mechanochemistry of Siberian branch of Russian Academy of Science
(630128, Russia, Novosibirsk, st. Kutateladze, 18, e-mail: vvk@ngs.ru)
Kuzina Valentina Vladimirovna, candidate of technical sciences,
associate professor of the department «Information and computing systems»
Penza State University of Architecture and Construction
(440028, Russia, Penza, German Titov St., 28, e-mail: kuzina@pguas.ru)

Abstract. Mathematical modeling makes it possible to study the operation of flowing three-dimensional electrodes in dynamics, to investigate the patterns of their operation depending on the kinetics of electrode processes, the properties of the electrode-solution system, electrolysis conditions, the design of the electrode system, etc. However, for correct calculations and correct interpretation of the results, the issues of mathematical stability and solvability of modeling equations need to be covered, since the system of differential equations under study is not classically stable both to changes in the initial data and to errors in the right part of the system. This fact makes it possible to classify such a system as rigid, for which the "shooting method" is used. The aim of the study is to solve the problems of mathematical stability and solvability of differential equations that model the distribution of the electrochemical process in a three-dimensional flowing electrode used to purify industrial wastewater from ions of heavy and non-ferrous metals. Due to the complexity and multidimensionality of the mathematical equations, the stability and solvability problems are considered with natural simplifications and assumptions, but they do not reduce the generality of their applicability for complex multidimensional mathematical models describing redox processes in flowing three-dimensional electrodes in a complete formulation. As a result of the research, it was revealed that the modeling system of differential equations is not classically stable both to changes in the initial data and to errors in the right-hand side of the system. The "shooting" method used to solve it must be constantly monitored, which we do with the help of the derived asymptotic estimate.

Keywords: mathematical modeling of electrochemical processes, flowing three-dimensional electrodes, carbon-graphite fibrous materials, wastewater treatment from metal ions, stability and solvability of modeling equations.

Введение. В работах [1-7] приведены математические модели и методы расчетов, разработанные нами для теоретического изучения и практических вычислений характеристик электрохимических процессов в реакторах с проточными трехмерными электродами. Изучение закономерностей электродных реакций и кинетики электродных процессов в зависимости от электрохимических и технологических параметров электрохимических систем и их конструкционных особенностей методами математического моделирования позволяет рассчитывать и оптимизировать конкретные электрохимические процессы с использованием ПТЭ, определять оптимальные условия ведения процессов и элементы конструкции электролизера. Однако для корректного проведения расчетов и правильной интерпретации результатов требуют освещения вопросы математической устойчивости и разрешимости моделирующих уравнений.

Цель исследования – решение некоторых вопросов математической корректности систем дифференциальных уравнений, описывающих электрохимические процессы в ПТЭ.

В силу достаточной сложности и многомерности математических уравнений, описывающих окислительно-восстановительные процессы в проточных трехмерных электродах в общей постановке [8], и связанные с этим проблемы построения и доказательства математических положений, в данной работе авторами рассмотрены математические аспекты моделирования процессов в ПТЭ при существенных упрощениях и допущениях, которые, однако, могут иметь место в реальных электрохимических процессах в пористых средах. Естественно, приведенные положения и утверждения будут справедливы и в более общих случаях, таких как, например, многомерность модели, ее нестационарность, в случае зависимости параметров модели и электрохимических констант от изменяющихся во времени технологических и реакционных условий процесса, а также от возможных корректировок управляющих параметров (плотность тока, подаваемого на ПТЭ, скорость протока электролита, электропроводность раствора и материала электрода и т.п.).

Материалы и результаты исследования. <u>*Устойчивость системы по начальным данным.*</u> Точность решения системы дифференциальных уравнений непосредственно зависит от ее устойчивости или неустойчивости при возможных ошибках, возможных при задании начальных данных, возникающих как при экспериментальных исследованиях, так при накоплении ошибок расчетного характера [9, 10].

Система моделирующих уравнений имеет вид [10]:

$$\frac{d^2E}{dx^2}=\frac{-\kappa'_{\text{Т}}(x)\,\kappa_{\text{ж}}}{\kappa_{\text{Т}}(x)\left(\kappa_{\text{Т}}(x)+\kappa_{\text{ж}}\right)}\frac{dE}{dx}+S_v\left(\frac{1}{\kappa_{\text{Т}}(x)}+\frac{1}{\kappa_{\text{ж}}}\right)J_s(x); \tag{1}$$

$$J_s(x)=j_0\,\frac{\exp(\alpha ZFE(x)/RT)-\exp((\alpha-1)ZFE(x)/RT)}{1+j_0\exp(\alpha ZFE(x)/RT)/ZFK_mC(x)}; \tag{2}$$

$$\frac{dC}{dx}=-\frac{S_v}{vZF}J_s(x); \tag{3}$$

$$\frac{dE}{dx}(0)=-\frac{J_{\text{ср}}}{\kappa_{\text{Т}}(0)};\quad \frac{dE}{dx}(L)=\frac{J_{\text{ср}}}{\kappa_{\text{ж}}};\quad C(0)=C_0. \tag{4}$$

Рассмотрим устойчивость системы (1) – (4). Введем обозначения комплексов параметров, участвующих в рассматриваемой математической модели:

$$A=\frac{ZF}{RT},\ B=\frac{j_0}{ZFK_m},\ D=\frac{S_v}{vZF},\ G=\left(\frac{1}{\kappa_{\text{Т}}}+\frac{1}{\kappa_{\text{ж}}}\right);$$

$$Y_1(x)=E(x)-\varphi_R+Y_1^0;\quad Y_2(x)=\frac{dE}{dx}(x)+Y_2^0;$$

$$Y_3(x)=C(x);\ Y_1^0=E(0);\ Y_2^0=\left.\frac{dE}{dx}\right|_{x=0};\ Y_3^0=C_0. \tag{5}$$

Тогда систему (1) – (4), описывающую электрохимический процесс в проточном трехмерном электроде, можно записать в виде автономной системы дифференциальных уравнений:

$$\frac{dY_1}{dx}=Y_2-Y_2^0=f_1\left(Y_1,Y_2,Y_3\right);$$

$$\frac{dY_2}{dx}=G\left(j_0\,\frac{\exp\left(A\alpha\left(Y_1-Y_1^0\right)\right)-\exp\left(A(\alpha-1)\left(Y_1-Y_1^0\right)\right)}{1+\left(B/Y_3\right)\exp\left(A\alpha\left(Y_1-Y_1^0\right)\right)}\right)=$$
$$=f_2\left(Y_1,Y_2,Y_3\right);$$

$$\frac{dY_3}{dx}=D\left(j_0\,\frac{\exp\left(A\alpha\left(Y_1-Y_1^0\right)\right)-\exp\left(A(\alpha-1)\left(Y_1-Y_1^0\right)\right)}{1+\left(B/Y_3\right)\exp\left(A\alpha\left(Y_1-Y_1^0\right)\right)}\right)=$$
$$=f_3\left(Y_1,Y_2,Y_3\right). \tag{6}$$

Запишем линеаризованную систему дифференциальных уравнений, соответствующую автономной системе дифференциальных уравнений (6):

$$\frac{dY_i}{dx} = \sum_{K=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial Y_K}\left(Y_K - Y_K^0\right), i = 1, \ldots n.$$

Характеристическим уравнением такой системы будет алгебраическая система относительно вектора λ:

$$\det\left[\left.\frac{\partial f_i}{\partial Y_K}\right|_{Y=Y_i^0} - \lambda\delta_K^i\right] = 0. \quad (7)$$

Решением этой системы являются числа $\lambda_1 = 0$, $\lambda_{2,3} = \pm\sqrt{\partial f_2/\partial Y_1}$, среди которых один из корней является положительным, что свидетельствует о неустойчивости дифференциальной системы (6) по начальным данным. Следовательно, и моделирующая электрохимический процесс система (1) – (4) является неустойчивой.

Неустойчивость системы (1) – (4) представляет собой существенную проблему с точки зрения численного решения задачи. Напомним, что математическая модель изучаемого процесса электроосаждения на ПТЭ является двухточечной задачей для дифференциального уравнения второго порядка, и для ее решения используется «метод стрельбы», когда недостающее условие на неизвестную функцию в начальной точке неизвестно и подбирается путем численных экспериментов из условия совпадения начального и конечного значений производной неизвестной функции с заданными условиями. Следовательно, недостающее условие на неизвестную искомую функцию распределения потенциала процесса должно быть выбрано наиболее приближенным к истинному значению. Как это можно сделать, показано в [10].

Об устойчивости решения моделирующей дифференциальных уравнений системы по правой части. Правая часть системы (1) – (4) в общем случае представляет собой сложную нелинейную функцию, зависящую от известных и экспериментально определяемых параметров и констант, в общем случае зависящих от координаты точки в трехмерном проточном электроде. Естественно предположить, что функции, участвующие в правой части дифференциальной системы, не всегда вычисляются достаточно точно, следовательно, возможно наличие отклонений вычисляемых значений от истинных. Очевидно, вопрос влияния ошибок вычисления функция правых частей на общую точность решения задачи требует рассмотрения и анализа.

Покажем, что система (1) – (4) не является устойчивой и по правой части даже в простом случае, когда удельную электропроводность ПТЭ по толщине можно считать постоянной величиной: $\kappa_т(x)=\kappa_т$, а в электрохимической реакции участвует один компонент. При этом внесение ошибки при вычислении значения $J_S(x)$ может привести к накоплению ошибки в решении $E(x)$. Уравнение

$$\frac{d^2E}{dx^2} = S_\nu\left(\frac{1}{\kappa_т(x)} + \frac{1}{\kappa_ж}\right)\sum J_S(x) \quad (8)$$

перепишем в виде:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{dE}{dx}(0) + \int_0^x S_\nu\left(\frac{1}{\kappa_т(x)} + \frac{1}{\kappa_ж}\right)\sum J_S(x)dx.$$

Обозначим $\frac{dE}{dx}(0) + \int_0^x S_\nu\left(\frac{1}{\kappa_т(x)} + \frac{1}{\kappa_ж}\right)\sum J_S(x)dx = \Phi(x,E)$, то есть

$$\frac{dE}{dx} = \Phi(x,E). \quad (9)$$

Пусть $E(x)$ – точное решение уравнения (9), а $\tilde{E}(x)$ – решение уравнения с ошибкой $\delta\Phi$ в правой части:

$$\frac{d\tilde{E}}{dx} = \Phi(x,\tilde{E}) + \delta\Phi. \quad (10)$$

Вычтем из (10) уравнение (9), получим:

$$\frac{d(\tilde{E} - E)}{dx} = \Phi(x,\tilde{E}) - \Phi(x,E) + \delta\Phi. \quad (11)$$

Из одной из теорем математического анализа следует $\frac{\Phi(x,\tilde{E}) - \Phi(x,E)}{\tilde{E} - E} = \frac{d\Phi}{dE}(x,\bar{E}) = \Phi'_E$, где $\bar{E}$ – некоторое промежуточное значение между E и $\tilde{E}$. Тогда (11) можно записать в виде: $\frac{d(\tilde{E} - E)}{dx} = (\tilde{E} - E)\Phi'_E(x,\bar{E}) + \delta\Phi$

или $\frac{d(\tilde{E} - E)}{(\tilde{E} - E)} = \Phi'_E(x,\bar{E})dx + \frac{\delta\Phi dx}{(\tilde{E} - E)}$.

Полагая, не ограничивая общности, что $\tilde{E}–E>0$, проинтегрируем последнее уравнение в пределах изменения x, то есть от 0 до L, получим после несложных преобразований:

$$\tilde{E}(L) - E(L) =$$

$$\left(\tilde{E}(0) - E(0)\right)\exp\left(L\Phi'_E(x,\bar{E})\right)\exp\left(\delta\Phi\int_0^L \frac{1}{\tilde{E}(x) - E(x)}dx\right). \quad (12)$$

Предположим, что $\tilde{E}–E$ – ограниченная величина, не зависимая от значений L и $\delta\Phi$, то есть $\tilde{E}(x)–E(x)\le M$ Тогда получаем неравенство: $\tilde{E}(x) - E(x) \ge M\exp\left(L\times\Phi'_E(x,\bar{E})\right)\exp\left(\delta\Phi\frac{L}{M}\right)$, которое показывает, что $\tilde{E}–E$ растет экспоненциально с ростом как L, так и $\delta\Phi$. Получили противоречие, которое говорит о том, что величина $\tilde{E}–E$ может неограниченно возрастать с ростом L и $\delta\Phi$.

Очевидно, что с ростом числа компонентов электроактивных частиц, участвующих в электродной реакции, пропорционально возрастет и количество уравнений дифференциальной системы (1) – (4) и, следовательно, увеличится вероятность возникновения ошибок в правой части системы. Это означает, что при создании практически реализуемой математической модели электрохимического процесса в проточном трехмерном электроде необходимо очень тщательно подходить к вычислению и формированию всех электрохимических параметров и функций, участвующих в математической модели.

Асимптотическая оценка решения.

Введем обозначения: $K_1 = \frac{\kappa_T + \kappa_ж}{\kappa_ж\kappa_T}S_V j_0$;

$$K_2 = \frac{\alpha ZF}{RT};\quad K_3 = \frac{(1-\alpha)ZF}{RT};\quad K_4 = j_0;$$

$$K_5 = ZFK_m;\ K_6 = \frac{\kappa_T\kappa_ж K_m}{(\kappa_T + \kappa_ж)v};\ K_7 = \frac{S_V j_0}{vZF};$$

$$K_8 = j_0 - \frac{I\kappa_ж K_m}{(\kappa_T + \kappa_ж)v} + C_0 ZFK_m;\ E_1 = -\frac{I}{\kappa_T}.$$

Уравнения (1) – (3) моделирующей системы (1) – (4), запишутся следующим образом:

$$\frac{d^2E}{dx^2}=K_1\left(\frac{\exp(K_2E)-\exp(-K_3)}{1+K_4\exp(K_2E)/K_5C(x)}\right);$$

$$\frac{dC}{dx}=K_7\left(\frac{\exp(K_2E)-\exp(K_3E)}{1+\exp(K_2E)/(K_5C(x))}\right).$$

Предположим, что $C{=}C_0 \sim const$, что реализуется, когда степень извлечения металла невысока, получим:

$$\frac{d^2E}{dx^2}=K_1\left(\frac{\exp(K_2E)-\exp(-K_3E)}{1+K_6\exp(K\ E)}\right),\ K_6=\frac{K_4}{C_0K_5}>0. \qquad (13)$$

Упростим уравнение (13), записывая его правую часть в виде некоторого приближения. Для этого воспользуемся разложением в ряды Тейлора экспонент в правой части:

$$\exp(K_2E)=1+K_2E+\frac{(K_2E)^2}{2!}+\frac{(K_2E)^3}{3!}+\ldots;$$

$$\exp(-k_3E)=1-K_3E+\frac{(k_3E)^2}{2!}-\frac{(K_3E)^3}{3!}+\ldots$$

Рассмотрим соотношения:

$$\exp(K_2E)-\exp(-K_3E)=$$

$$=(K_2+K_3)E+\frac{K_2{}^2-K_3{}^2}{2!}E^2+\frac{K_2{}^3+K_3{}^3}{3!}E^3+\ldots,$$

$$1+K_6\exp(K_2E)=$$

$$=1+K_6(1+K_2E+\frac{(K_2E)^2}{2!}+\frac{(K_2E)^3}{3!}+\ldots)=$$

$$(1+K_6)+K_2K_6E+\frac{K_2{}^2K_6E^2}{2!}+\frac{K_2{}^3K_6E^3}{3!}+\ldots$$

Тогда частное $\dfrac{\exp(K_2E)-\exp(-K_3E)}{1+K_6\exp(K_2E)}$ в правой части уравнения (13) можно представить в виде:

$$\frac{\exp(K_2E)-\exp(-K_3E)}{1+K_6\exp(K_2E)}=$$

$$=\frac{(K_2+K_3)E+\dfrac{K_2{}^2-K_3{}^2}{2!}E^2+\dfrac{K_2{}^3+K_3{}^3}{3!}E^3+\ldots}{(1+K_6)+K_2K_6E+\dfrac{K_2{}^2K_6}{2!}E^2+\dfrac{K_2{}^3K_6}{3!}E^3+\ldots}$$

Обозначим:

$$A=K_2+K_3,\ B=\frac{K_2{}^2-K_3{}^2}{2!}E^2+\frac{K_2{}^3+K_3{}^3}{3!}E^3+\ldots,$$

$$C=1+K_6,\ D=K_2K_6,\ W=\frac{K_2{}^2K_6}{2!}E^2+\frac{K_2{}^3K_6}{3!}E^3+\ldots$$

Тогда

$$\frac{\exp(K_2E)-\exp(-K_3E)}{1+K_6\exp(K_2E)}=\frac{AE+B}{C+DE+W}=$$

$$=\frac{A}{C}E+(\frac{AE+B}{DE+C+E}-\frac{AE}{C})=$$

$$=\frac{A}{C}E+\frac{ACE+BC-ADE^2-ACE-AWE}{C(DE+C+W)}=\frac{A}{C}E+F.$$

Здесь $F=\dfrac{BC-ADE^2-AWE}{C(DE+C+W)}$, причем числитель в F содержит E во второй и в более высоких степенях.

Таким образом, уравнение первого приближения для (13) имеет вид: $\dfrac{d^2E}{dx^2}=K_1\dfrac{A}{C}E$ или

$$\frac{d^2E}{dx^2}=K_1\frac{K_2+K_3}{1+K_6}E. \qquad (14)$$

Заметим, что характеристическое уравнение для (14) $\lambda^2-K_1\dfrac{K_2+K_3}{1+K_6}=0$ имеет два корня: положительный и отрицательный, что свидетельствует о неустойчивости уравнения первого приближения. Если $K_1 = K_1(x)$, то уравнение первого приближения имеет вид:

$$\frac{d^2E}{dx}-q(x)E=0, x\ge x_0\ge 0, \qquad (15)$$

где $q(x)\equiv K_1(x)\dfrac{K_2+K_3}{1+K_6}>0, x\ge 0.$

Уравнение (15) можно привести к системе двух линейных дифференциальных уравнений первого порядка вида:

$$\begin{cases}E'=P_{11}(x)E+P_{12}(x)Z;\\ Z'=P_{21}(x)E+P_{22}(x)Z,\end{cases} \qquad (16)$$

для чего необходимо выбрать P_{ij} так, чтобы выполнились условия:

$$P_{11}+P_{22}+\frac{P'_{12}}{P_{12}}=0,\quad p_{12}P_{21}+P'_{11}+P_{11}^2-q(x)=0. \qquad (17)$$

Подберем $P_{ij}(x)$ так, чтобы с помощью неравенства Важевского [10]:

$$\|X(x)\|\le\|X(x_0)\|\exp(\int_{x_0}^{x}\Lambda(t)dt, \qquad (18)$$

$$X=col(E,Z),$$

$$\Lambda=0{,}5\left[P_{11}+P_{22}+\sqrt{(P_{11}-P_{22})^2+(P_{12}+P_{21})}\right] \qquad (19)$$

можно было бы получить оценку нормы решения системы (16) и, следовательно, уравнения (15).

Положим $P_{11}=\sqrt{q},\ \ P_{12}=\sqrt{q}$. Тогда система (17) принимает вид:

$$\begin{cases}\sqrt{q}+P_{22}+\dfrac{q'}{2q}=0,\\ \sqrt{q}P_{21}+\dfrac{q'}{2\sqrt{q}}=0.\end{cases}$$

Решая эту систему относительно P_{22} и P_{21}, находим: $P_{22}=-\sqrt{q}-\dfrac{q'}{2q}, P_{21}=-\dfrac{q'}{2q}.$

Исследуемая система примет вид:

$$\begin{cases}E'=\sqrt{q}E+\sqrt{q}Z,\\ Z'=-\dfrac{q'}{2q}E+(-\sqrt{q}-\dfrac{q'}{2q})Z.\end{cases}$$

При этом $\Lambda=0{,}5\left[-\dfrac{q'}{2q}+\sqrt{5q+\dfrac{q'}{\sqrt{q}}+0{,}5(\dfrac{q'}{q})^2}\right]$. И, следовательно, оценку (18) можно записать в виде в виде:

$$\|X\|\le\|X(x_0)\|\sqrt{\sqrt{\frac{q(x_0)}{q(x)}}}\exp\left[0{,}5\int_{x_0}^{x}\sqrt{5q+\frac{q'}{\sqrt{q}}+0{,}5\left(\frac{q'}{q}\right)^2}dt\right].$$

Заключение. Таким образом, исследуемая система дифференциальных уравнений не является классически устойчивой как к изменению начальных данных, так и к ошибкам правой части системы. Этот факт позволяет классифицировать такую систему как жесткую [11-13]. Как уже отмечалось, ошибки в значениях начальных данных могут возникнуть из-за возможных погрешностей при определении электрохимических констант, участвующих в формировании начальных данных, а ошибки в правой части системы, кроме того, могут произойти из-за погрешностей вычислений, обусловленных её сильной нелинейностью.

Краевая задача для системы (1 – 4) является двухточечной, а не классической задачей Коши и, следовательно, для её решения необходимо применять метод «стрельбы», когда для неизвестных функций краевые условия задаются в начале интервала изменения переменной, задача решается, как задача Коши, затем начальные значения для функций, для которых краевые условия заданы в конце интервала интегрирования, корректируются, и система решается заново и т.д. Очевидно, что для систем, неустойчивых по начальным данным, метод «стрельбы» необходимо постоянно контролировать, что и делается нами с помощью выведен¬ной асимптотической оценки.

Для решения жестких систем рекомендуется применять неявные методы Рунге – Кутта [14-16], полуявные методы Розенброка [17, 18], а также хорошо зарекомендовавшие себя жестко устойчивые методы с переменным шагом, так называемые «формулы дифференцирования назад», где производная в текущей точке аппроксимируется по нескольким предыдущим значениям [12]. Такие методы предложены и проанализированы, например, в работах [12, 19] и программно реализованы в работе [20]. Одну из программных разработок мы использовали при проведении численных расчетов там, где это необходимо.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Углеродные волокнистые электроды: свойства, модификация, процессы и электролизеры. Математическое моделирование и оптимизация: моногр. / В.К. Варенцов, А.Н. Кошев, В.И. Варенцова, В.В. Кузина. – Пенза: ПГУАС, 2021. – 176 с.
2. Окислительно-восстановительные процессы на проточных трехмерных электродах. Математическое моделирование. Теория. Эксперимент: моногр. / В.К. Варенцов, А.Н. Кошев, В.И. Варенцова, В.В. Кузина. – Пенза: ПГУАС, 2020. – 172 с.
3. Варенцов, В.К. Современные проблемы электролиза и задачи оптимизации процессов в реакторах с трехмерными углеродными электродами: моногр. / В.К. Варенцов, А.Н. Кошев, В.И. Варенцова. – Пенза: ПГУАС, 2015. – 286 с.
4. Теоретические основы и моделирование электрохимических процессов в системах с проточными трехмерными электродами: моногр. / В.К. Варенцов, А.Н. Кошев, И.Ф. Сухов, В.В. Кузина. – Пенза: ПГУАС, 2014. – 128 с.
5. Кошев, А.Н. Разработка и исследование математических моделей нестационарных процессов в электрохимических реакторах с проточными трехмерными электродами: моногр. / А.Н. Кошев, В.В. Кузина. – Пенза: ПГУАС, 2011. – 119 с.
6. Гвоздева, И.Г. Управление электрохимическим реактором с проточными трехмерными электродами за счет оптимального распределения электропроводности системы / И.Г. Гвоздева, А.Н. Кошев, В.К. Варенцов // Управление большими системами, 2010, № 29. – С. 184-200.
7. Варенцов В.К. Моделирование процесса газообразования водорода в проточных трехмерных электродах при извлечении металлов из растворов электролитов / В.К. Варенцов, А.Н. Кошев // Региональная архитектура и строительство, 2017, № 3 (32). – С. 128–135.
8. Процессы в пористом электроде в случае распределенной скорости протока электролита / А.Н. Кошев, В.К. Варенцов, И.Ф. Сухов, И.Г. Гвоздева // Математическое моделирование, 2013, Т. 25, № 2. – С. 97-110.
9. Кошев А.Н. Математическое моделирование процесса электроосаждения металлов из многокомпонентных систем на проточные объемно-пористые электроды / А.Н. Кошев, В.К. Варенцов, В.Г. Камбург // Известия СО АН СССР. Сер. хим. наук. – 1984. – Вып. 6. – С. 24-27.
10. Кошев А.Н. Краевые условия для дифференциальных уравнений, описывающих электрохимические процессы в реакторах с проточными трехмерными электродами / А.Н. Кошев, В.К. Варенцов // Математическое моделирование, 2014, Т. 26, № 2. – С. 11-23.
11. Демидович Б.П. Лекции по математической теории устойчивости. / Б.П. Демидович. – М.: Наука, 1967. – 472 с.
12. Хайрер Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. / Э. Хайрер, Г. Ваннер. – М.: Мир, 1999. – 685 с.
13. Скворцов Л.М. Простые явные методы численного решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений / Л.М. Скворцов // Вычислительные методы и программирование, 2008, Т. 9, № 6. – С. 154-162.
14. Скворцов Л.М. Диагонально-неявные методы Рунге – Кутты для жестких задач / Л.М. Скворцов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 46:12 (2006). – 2209-2222; Comput. Math. Math. Phys., 46:12 (2006), 2110-2123.
15. Скворцов Л.М. Явные адаптивные методы Рунге – Кутты / Л.М. Скворцов // Матем. моделирование, 2011, Т. 23, № 7. – С. 73–87.
16. Зубанов А.М. Численное исследование одношаговых явно-неявных методов, L-эквивалентных жестко точным двухстадийным схемам Рунге – Кутты / А.М. Зубанов, П.Д. Ширков. // Матем. Моделирование, 2012, Т. 24, № 12. – С. 129-136.
17. Rosenbrock H.H. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations / H.H. Rosenbrock // Computer, 1963, N 5. – P. 329-330.
18. Альшин А.Б. Об одной новой двухстадийной схеме Розенброка для дифференциально-алгебраических задач / А.Б. Альшин, Е.А. Альшина // Матем. моделирование, 2011, Т. 23, № 3. – С. 139-160.
19. Годунов С.К. Разностные схемы (введение в теорию) / Годунов С.К., Рябенький В.С. – М.: Наука, 1977. – 440 с.
20. Hindmarch A.C. Gear: Ordinary differential equation system solver, Lawrence Livermore Laboratory, University of California, Livermore, 1974. – Rev. 3, UCSD-30001.

Статья поступила в редакцию 05.11.2021
Статья принята к публикации 07.12.2021